

Комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФОРМУВАННЯ ЩІЛЬНОСТІ ВУГЛЕЦЕВИХ КОМПОЗИТІВ ПІД ЧАС УЩІЛЬНЕННЯ З ГАЗОВОЇ ФАЗИ

Скачков В.О., Іванов В.І.

Запорізька державна інженерна академія, colourmet@zgia.zp.ua

Властивості вуглецевих композитів залежать від поруватості структури, зниження якої сягається процесами заповнення її піролітичним вуглецем із газової фази (природного газу) під час ізотермічного газофазового ущільнення.

Вважають, що під час реалізації даного процесу швидкість осадження піролітичного вуглецю у поруватій структурі карбонізованого вуглепластика є достатньо малою, а поруватість карбонізованого вуглепластика є функцією часу, яка поволі змінюється.

Моделювання процесу ущільнення вуглецевих композитів із газової фази припускає побудову зв'язаної системи диференціальних рівнянь, що описують дифузію реакційних газів до поруватої структури карбонізованого вуглепластика з урахуванням їх розкладання на стінках пор, а також формування фактичної щільності за товщиною виробу з вуглецевого композиту.

У такому разі завдання про перенесення маси в одиничній циліндровій порі карбонізованого вуглепластика можна подати нижче наведеною системою рівнянь:

$$\frac{d^2 C_i}{d\ell^2} = \frac{2k_i^s \cdot C_i}{\bar{r} \cdot D_i}; \quad (1)$$

$$\vartheta \cdot \frac{d\rho}{d\ell} = \sum_{i=1}^N S_i \cdot k_i^s \cdot C_i; \quad (2)$$

$$C_i|_{\ell=0} = C_i^0; \quad (3)$$

$$\left. \frac{dC_i}{d\ell} \right|_{\ell=h} = 0; \quad (4)$$

$$\rho|_{\ell=0} = \rho_0, \quad (5)$$

де C_i^0 , C_i – початкова та поточна концентрація i -го реагуючого компонента в обсязі реактора, кг/м³, відповідно; ℓ , \bar{r} – глибина та середній радіус пори, м, відповідно; k_i^s – константа швидкості гетерогенної реакції i -го реагуючого компонента, м/с на поверхні ущільнюваного вуглепластика S , м²; D_i – коефіцієнт дифузії i -го реагуючого компонента, м²/с; ϑ – швидкість зростання піролітичного вуглецю, м/с; $2h$ – товщина виробу, м; S_i – питома реакційна поверхня композиту, м²/кг; ρ_0 – початкова щільність матеріалу карбонізованого вуглепластика, кг/м³; N – кількість реагуючих компонентів в обсязі реактора.

Розв'язання диференціального рівняння (1) з урахуванням умов (3)–(5) можна записати у вигляді співвідношень:

$$C_i = \frac{C_i^0 \cdot \left\{ \exp \left[\left\langle 2k_i^s / \bar{r} \cdot D_i \right\rangle^{0.5} \cdot (\ell - 2h) \right] + \exp \left[-\ell \cdot \left\langle 2k_i^s / \bar{r} \cdot D_i \right\rangle^{0.5} \right] \right\}}{1 + \exp \left[2 \cdot \ell \cdot \left\langle 2k_i^s / \bar{r} \cdot D_i \right\rangle \right]}, \quad (6)$$

Значення питомої реакційної поверхні карбонізованого вуглепластика S_i відповідає питомій поверхні пор, тому її можна визначити за формулою:

$$S_i = \frac{2(\rho_i - \rho)}{\bar{r} \cdot \rho_i \cdot \rho}, \quad (7)$$

де ρ_n – дійсна щільність матеріалу карбонізованого вуглепластика, кг/м³.

Підставляючи формулу (7) до диференційного рівняння (2) та враховуючи співвідношення

$$\vartheta = \frac{1}{\rho_0} \cdot \sum_{i=1}^N k_i^s \cdot C_i \quad (8)$$

одержують

$$\frac{d\rho}{dl} = \frac{2(\rho_n - \rho)}{\bar{r} \cdot \rho_n \cdot \rho} \cdot \sum_{i=1}^N h_i \cdot C_i \cdot \frac{\rho_0}{\sum_{i=1}^N k_i^s} \quad (9)$$

Під час подальшого інтегрування рівняння (9) за ρ (у межах від ρ_0 до ρ) та за ℓ (у межах від 0 до ℓ) одержують трансцендентне рівняння щодо параметра, який характеризує змінювання щільності матеріалу ущільнюваного вуглепластика за товщиною стінки виробу:

$$\rho_n \cdot \ln \left(\frac{\rho_n - \rho}{\rho_n - \rho_0} \right) = \frac{2\rho_0}{\bar{r} \cdot \left\langle \frac{2k_i^s}{\bar{r} \cdot D_i} \right\rangle^{0,5} \cdot \rho_n \cdot \sum_{i=1}^N k_i^s} \cdot \sum_{i=1}^N k_i^s \cdot C_i^0 \cdot \left\{ \frac{1 + \exp \left[\left\langle \frac{2k_i^s}{\bar{r} \cdot D_i} \right\rangle^{0,5} \cdot (\ell - 2h) \right] - \exp \left[-\ell \cdot \left\langle \frac{2k_i^s}{\bar{r} \cdot D_i} \right\rangle^{0,5} \right] - \exp \left[-2h \cdot \left\langle \frac{2k_i^s}{\bar{r} \cdot D_i} \right\rangle^{0,5} \right]}{1 - \exp \left[-2h \cdot \left\langle \frac{2k_i^s}{\bar{r} \cdot D_i} \right\rangle^{0,5} \right]} \right\} \quad (10)$$

Для реалізації обчислювального експерименту на ПЕОМ з використанням запропонованої математичної моделі розроблено комп'ютерну програму на алгоритмічній мові TURBO-PASKAL.

Початковими даними для розрахунків є: склад і витрата природного газу; геометричні параметри реактора; початкова поруватість карбонізованого вуглепластика; середній радіус пор; товщина стінки виробу з карбонізованого вуглепластика; температура та залишковий тиск у реакторі; тривалість процесу осадження піролітичного вуглецю; енергія активації процесів розкладання індивідуальних вуглеводнів.

Вихідними параметрами роботи програми слугують: розподіл концентрації індивідуальних вуглеводнів (радикалів) в обсязі реактора та у поруватій структурі ущільнюваного вуглепластика; швидкість осадження піролітичного вуглецю; розподіл щільності карбонізованого вуглепластика за товщиною стінки виробу на його різних ділянках.

Апробацію розробленої математичної моделі здійснювали шляхом розрахунків піролітичного ущільнення композиту на основі графітованих вуглецевих тканин і феноло-формальдегідного в'язучого новолачного типу в середовищі природного газу (96,30% CH_4 ; 0,50% C_2H_6 ; 0,35% C_3H_8 ; 0,05% C_4H_{10} ; 2,0% H_2 ; 0,80% N_2) за температури 1000...1060 °C та залишкового тиску 1,0 кПа (витрата газу – $1,0 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$, відкрита поруватість карбонізованого композиту – 26%, середній радіус пор – 8,0 мкм).

Зіставленням розрахункових значень щільності карбонізованого вуглепластика та фактичних даних, одержаних під час проведення експериментів, встановлено достовірність запропонованої моделі та застосовність її для кількісної оцінки розподілу щільності вуглецевого матеріалу за товщиною стінки виробу під час його ізотермічного ущільнення із газової фази (величина розбіжності зазначених значень не перевищувала 0,6%).